

$C_6H_6 \cdots H_2O$	E_{HB} , kJ/mol	$C_6H_6 \cdots NH_3$
-5,109		-0,039

The total energy of the intermolecular interaction (B3LYP/aug-cc-pVTZ)		
2,712	r_{H-C} , Å	2,948
72,683	α_{H-C-C} , °	87,237
2,589	r_0 , Å	2,945
-308,810	$E(A \cdots B)$, Hartree	-288,931
-76,467	$E(A \cdots b)$, Hartree	-56,590
-232,341	$E(a \cdots B)$, Hartree	-232,341
-6,062	ΔE_{BSSSE} , kJ/mol	-2,359

The dispersion interactions		
-0,953	$E(A \cdots B)$, kJ/mol	-2,320

$$E(\text{atom} \cdots \text{atom}) = -0,000498 \cdot (r/10)^{-6} - 0,0000095 \cdot (r/10)^{-8} + 36000 \cdot e^{-35,7 \cdot r/10}$$

H	O	H	$E(\text{atom} \cdots \text{atom})$, kJ/mol	H	H	N	H
-0,158	-0,116	-0,061	C	-0,125	-0,032	-0,114	-0,020
-0,151	-0,204	-0,080	C	-0,156	-0,065	-0,280	-0,042
0,951	-0,324	-0,104	C	0,042	-0,063	-0,366	-0,073
0,671	-0,313	-0,102	C	-0,179	-0,030	-0,196	-0,051
-0,175	-0,184	-0,077	C	-0,094	-0,016	-0,084	-0,023
-0,152	-0,110	-0,060	C	-0,075	-0,017	-0,067	-0,016
-0,004	-0,019	-0,001	H	-0,007	-0,001	-0,036	-0,001
-0,016	-0,057	-0,001	H	-0,014	-0,001	-0,070	-0,002
-0,013	-0,050	-0,001	H	-0,003	0,000	-0,018	-0,001
-0,003	-0,016	-0,001	H	-0,001	0,000	-0,005	0,000
-0,001	-0,007	-0,001	H	-0,001	0,000	-0,004	0,000
-0,001	-0,008	-0,001	H	-0,001	0,000	-0,008	0,000
H	O	H	r , Å	H	H	N	H
3,68	4,53	4,51	C	3,91	5,05	4,88	5,45
3,18	4,06	4,29	C	3,20	4,46	4,13	4,81
2,65	3,58	4,07	C	2,95	4,49	3,87	4,37
2,71	3,63	4,09	C	3,50	5,10	4,43	4,65
3,28	4,15	4,32	C	4,16	5,63	5,14	5,31
3,72	4,57	4,52	C	4,34	5,61	5,34	5,68
3,75	4,52	4,74	H	3,42	4,41	4,20	5,03
2,93	3,73	4,39	H	2,99	4,46	3,73	4,25
3,02	3,81	4,42	H	3,90	5,52	4,72	4,76
3,90	4,66	4,79	H	4,92	6,37	5,85	5,87
4,55	5,31	5,11	H	5,19	6,33	6,16	6,45
4,49	5,25	5,09	H	4,55	5,43	5,44	6,09